УДК 539.1

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК И ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ГЦК ФАЗЫ СПЛАВА Мп—21 ат. % Ga

В. М. Силонов, С. Ю. Родин

(кафедра физики твердого тела)

Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей в высокотемпературной ГЦК фазе сплава Мп — 21 ат. % Ga установлено существование сильного ближнего порядка, определены его параметры, найдена характеристическая температура ($\Theta_D = 200$ °C). Методом модельного потенциала рассчитаны упругие постоянные, использовавшиеся при расчетах модулирующих функций размерного эффекта. Значения параметров ближнего порядка α_i для первых четырех координационных сфер оказались соответственно равными —0,16; 0,23; 0,12; —0,24.

Существование ближнего порядка в расположении атомов компонент твердых растворов методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) установлено во многих системах [1, 2]. В отличие от изучавшихся ранее твердых растворов в сплавах системы Mn-Ga, богатых марганцем, при фиксированном составе реализуется несколько фаз. Так, в сплаве Мп-21 ат. % Ga существует высокотемпературная антиферромагнитная ГЦК фаза, при температурах около 700 °C переходящая в ГПУ фазу DO19, которая в свою очередь при температуре 500 °С переходит в фазу DO22 с тетрагональной решеткой [3-5]. Цель данной работы состояла в установлении с использованием прямого метода ДРРЛ существования ближнего порядка в высокотемпературной ГЦК фазе и определение его параметров. Предметом данной работы также является определение для изучаемой высокотемпературной ГЦК фазы характеристической дебаевской температуры и отношений упругих постоянных $\hat{C}_{12}/\hat{C}_{11}$ и $\hat{C}_{44}/\hat{C}_{11}$, необходимых для получения параметров ближнего порядка.

Сплав для исследования был выплавлен в высокочастотной индукционной печи в атмосфере аргона в ЦНИИЧМ им. Бардина. Образец отжигался в течение 3 ч при температуре 850°C, а затем закаливался в воду. Измерения интенсивности ДРРЛ проводились на рентгеновском дифрактометре со сцинтилляционной регистрацией на монохроматическом Fe-Ka излучении. Обработка экспериментальных данных описана в работе [6], а применение метода ДРРЛ для определения дебаевской температуры О_D в [7]. Для ускорения и упрощения расчетов параметров ближнего порядка нами был составлен комплекс программ для персонального компьютера на языке Microsoft—Fortran—5.1, который включает в себя графическую программу для определения наилучшего приближения синтезированной кривой к экспериментальной, программу для расчета параметров ближнего порядка, базу данных о характеристиках, о комптоновском рассеянии и об атомных факторах рассеяния для ряда элементов. Данные о комптоновском рассеянии были взяты из работы [8], а об атомных факторах рассеяния из работы [9]. Фазовый анализ закаленных образцов показал полное отсутствие фаз DO_{22} и DO_{19} .

Результаты измерений интенсивности ДРРЛ за вычетом теплового, двойного брэгговского, лауэвского и комптоновского рассеяний представлены на рис. 1. Видно, что в области углов 20=25°-35° имеется

92

четкий диффузный максимум, характерный для ближнего порядка. Из рис. 1 также видно, что в области первого сверкструктурного отражения находится диффузный максимум, а в области второго — минимум.



линия — синтез, точки — эксперимент



Рис. 2. Зависимость от характеристической температуры суммы среднеквадратичных отклонений экспериментальных значений ДРРЛ от рассчитанных теоретически для сплава Мп — 21 ат.% Ga

Оценка значений упругих постоянных для высокотемпературной ГЦК фазы сплава Mn-21 ат.% Ga проводилась методом модельного потенциала аналогично тому, как это сделано в работе [10]. Соответствующие отношения упругих постоянных, необходимые для расчета модулирующих функций размерного эффекта, оказались равными $C_{12}/C_{11}=0,74$ и $C_{44}/C_{11}=0,27$. При этом использовались таблицы [11]. До расчетов параметров ближнего порядка проводилась оценка характеристической температуры данного сплава. Для этого методом наименьших квадратов находилось наилучшее приближение теоретически рассчитанной кривой интенсивности ДРРЛ и экспериментальных значений при различных значениях дебаевской температуры. Полученная таким образом зависимость от Θ_D суммы среднеквад ϕ атичных отклонений $\Sigma \sigma_l^2$ теоретических (синтезированных) значений интенсивности, обусловленных ближним порядком и статическими смещениями, от полученных экспериментально приведена на рис. 2. На представленной кривой имеется минимум вблизи температуры Ор=200 К. Это значение далее использовалось при определении параметров ближнего порядка.

Из кривой диффузного рассеяния были рассчитаны параметры ближнего порядка для первых четырех координационных сфер: $\alpha_1 = -0,16$, $\alpha_2 = 0,23$, $\alpha_3 = 0,12$, $\alpha_4 = -0,24$. Выявленное чередование знаков является характерным для сверхструктуры Ni₄Mo. По этим значениям параметров ближнего порядка строилась синтезированная кривая, которая изображена на рис. 1. Из рисунка видно, что экспериментальная и теоретическая кривые достаточно близки друг и другу, что свидетельствует о достоверности полученных параметров ближнего порядка и о возможности определения упругих постоянных методом модельного потенциала.

Таким образом, результаты экспериментального исследования методом ДРРЛ позволили определить характеристическую дебаевскую температуру ($\Theta_D = 200$ K) и выявить существование сильного ближнего порядка в высокотемпературной ГЦК фазе сплава Mn—21 ат.% Ga. Можно также отметить, что метод модельного потенциала может быть использован для нахождения отношений упругих модулей сплавов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Иверонова В. И., Кацнельсон А. А. Ближний порядок в твердых раствоpax. M. 1977.
- 2. Силонов В. М. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М., 1990.
- 3. Власова Е. Н., Равдель М. П., Петрова О. Н.//ЛАН. 1977. 237. № 5. C. 1076.
- 4. Власова Е. Н., Равдель М. П.//Изв. АН, Металлы. 1983. 6. № 6. С. 107.
- 5. Гоманьков В. И., Равдель М. П., Ногин Н. И. и др.//ФММ. 1979. 47, № 4. C. 735.
- 6. Силонов В. М., Салех Хамами//ФММ. 1990, № 4. С. 124. 7. Кацнельсон А. А., Силонов В. М., Абу Аль Шамлат Салама// //Весян. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1994. № 5. С. 66 (Moscow University Phys. Bull. 1994. N 5. P. 56).
- В. Стотет Т., Liberman D.//J. Chem. Phys. 1970. 53, N 5. P. 1891.
 9. Hubbel J. N., Veigele Wm. J., Brigge E. A.//J. Phys. Chem. Ref. Data. 1975. 4, N 3. P. 471.
 10. Силонов В. М., Энхтор Л., Родин С. Ю., Абдуразаков А. А. Расчет П. Силонов В. М., Энхтор Л., Родин С. Ю., Абдуразаков А. А. Расчет
- упругих постоянных некоторых ГЦК переходных металлов и сплавов на их основе методом модельного потенциала: Деп. ВИНИТИ № 202-В96. М., 1996.
- 11. Кацнельсон А. А., Крисько О. В., Силенов В. М., Скоробогатова Т. В. Учет эффектов смещений атомов в диффузном рассеянии поликристаллическими ОЦК и ГЦК сплавами: Деп. ВИНИТИ № 4751. М., 1983.

Поступила в редакцию 01.04.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 5

УДК 534.2

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛЕ КВАРЦА

К. Н. Баранский, И. В. Шляхов

(кафедра физики полимеров и кристаллов)

Проведен расчет отклонений направлений лучей акустических волн от волновых нормалей в кварце. Графически представлено явление концентрации лучей (фокусировки фононов) в плоскостях упругой симметрии и в пространстве. Установлено поответствие главных направлений фокуспровки квазипродольных и квазипоперечных воли направлениям их минимального поглощения.

Фокусировкой фононов принято называть концентрацию около некоторых направлений в кристалле потоков энергии необыкновенных акустических волн и, соответственно, векторов лучей s=S/|S|, где S вектор групповой скорости. Явление это связано с тем обстоятельством, что лучи необыжновенных волы каждой моды отклоняются от направлений своих нормалей п всегда к направлениям, соответствующим локальным максимумам групповых скоростей волн этой моды [1]. Наглядное представление о направлениях фокусировки фононов дают сечения поверхности обратных фазовых скоростей V-1 или поверхности рефракции плоскостями упругой симметрии кристалла. Каждая точка такого сечения соответствует концу вектора рефракции $\mathbf{m} = \mathbf{n}/|\mathbf{V}|$, а нормаль к сечению в этой точке совпадает с направлением вектора луча этой же волны. Участкам сечения поверхности рефракции с нулевой гауссовой кривизной соответствуют параллельные нучки лучей, т. е. фокусировка фононов [2]. (Гауссова кривизна определяется как произведение первой главной кривизны и второй главной кривизны в точке поверхности, а средняя кривизна есть полусумма этих величин [3].)

При исследовании фокусировки фононов в кристалле кварца для заданных направлений волновой пормали рассчитывались фазовые скорости волн, определялись их поляризация, направления лучей и величины обратных групповых скоростей. При этом использовался алгоритм

94